

Síkhibák karakterizációja röntgen vonalprofil analízis alapján köbös és hexagonális kristályokban

A doktori értekezés tézisei

Balogh Levente

Témavezető:

Dr. Ungár Tamás

egyetemi tanár

ELTE TTK Fizika Doktori Iskola

Iskolavezető: Dr. Horváth Zalán

Anyagtudomány és Szilárdtestfizika Program

Programvezető: Dr. Lendvai János



Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar

Fizikai Intézet, Anyagfizikai Tanszék

Budapest 2009

A munka előzményei és célkitűzései

Kristályos anyagok számos fizikai tulajdonságát alapvetően meghatározza a mikroszerkezet, aminek igen sokféle megjelenési formája létezik és így azonos kristályszerkezetű anyagokat nagyon különböző fizikai tulajdonsággal tud felruházni. Egy kristályos anyag keménysége, ridegsége, folyáshatára és sok más tulajdonsága erősen mikroszerkezet függő. A fémek és ötvözeteknek az alakítási-, szilárdoldatos-, kiválásos keményítése mind a mikroszerkezet megfelelő módon történő módosításával történik.

Egy anyag mikroszerkezetét az előállítási körülmények illetve az utólagosan alkalmazott kezelések határozzák meg. Ahhoz, hogy változatos és tervezhető fizikai tulajdonságokkal rendelkező anyagokat állíthassunk elő, szükség van olyan módszerekre, amik segítségével meghatározhatjuk az anyagban előforduló kristályhibák mennyiségét és minőségét, vagyis a mikroszerkezetet.

A röntgen vonalprofil analízis (RVPA) az utóbbi időben a transzmissziós elektron mikroszkópia (TEM) mellett a mikroszerkezet vizsgálatának egyik leghatékonyabb alternatív módszerévé fejlődött. A RVPA számos vonatkozásban hasonló, ugyanakkor igen sok tekintetben más típusú információkat szolgáltat a mikroszerkezeetről mint a TEM.

A RVPA módszere alapvetően két különböző mikroszerkezeti elemről ad felvilágosítást: (i) a kristallit méretről, illetve (ii) a különböző kristályhibák sűrűségéről és eloszlásáról. A kristallit méret [Bertaut, 1950; Warren, 1950; Guinier, 1963; Ungár et. al., 2005] valamint a diszlokációk [Krivoglaz, 1969; Wilkens, 1970; Gaál, 1975; Groma, 1998; Ungár et. al., 1999] és ponthibák [Krivoglaz, 1969; Wagner & Seeger, 1969; Ungár et. al., 2007] hatásának fizikai modelljeit az utóbbi években sikerült kidolgozni.

Az különböző rétegeződési hibák, ugyanolyan vagy még erőteljesebb hatást gyakorolnak a vonalszélesedésre, mint a diszlokációk. Köbös fémek vagy ötvözetek esetében a rétegeződési hibák akkor játszanak fontos szerepet, amikor a rétegeződési hiba energia kicsiny. Ilyen néhány tiszta fém, például az ezüst és nikkel [Zhu et. al., 2005, 2005a; Gubiza et. al., 2007a; Gubicza et. al., 2008; Balogh et. al., 2008a(S)] vagy néhány ötvözet, mint a sárgaréz, rozsdamentes acél vagy a Ni3Al fémközi vegyület [Zhu et. al., 2005; Balogh et. al., 2008a(S)]. Hexagonális szerkezetű fémekben, mint például Ti, Zr és Mg-ban eleve nincs meg a képlékeny alakváltozás kompatibilitásához szükséges legalább öt csúszási rendszer [Chun et. al., 2005; Ungár et. al., 2008(S)], ezért ezekben a tiszta fémekben az ikerképződés a képlékeny deformáció egyik alapvető módusa.

A jelen disszertációban a síkhibák, nevezetesen az ikerhatárok és rétegződési hibák kvalitatív és kvantitatív meghatározásának a módszerét dolgozom ki a röntgen vonalprofil analízis alapján lapcentrált köbös (fcc) és szoros illeszkedésű hexagonális (hcp) kristályok esetében.

Új tudományos eredmények

1. Általános elméletet dolgoztam ki ikerhatárok által okozott diffrakciós vonalkiszélesedésre. Megmutattam, hogy ez az elmélet egyaránt alkalmazható u.n. *részlegesen-merohedrális* illetve *nem-merohedrális* ikresedés esetén. Lényeges megjegyezni, hogy a különböző *merohedralitás* kristallográfiai szempontból alapvetően eltérő viselkedést eredményez [Balogh et. al., 2009(S)].
2. Kidolgoztam az ikresedés kettős-lamella modelljét, amelynek alapján megmutattam, hogy az ikresedés okozta vonalszélesedés általános profil függvénye mindig egy szimmetrikus és antiszimmetrikus Lorentz típusú függvény összege, ami a következő alakban írható:

$$\frac{1+A(x-x_0)}{1-[(x-x_0)/B]^2} ,$$

ahol x_0 az adott reflexió helyzete, továbbá A és B az ikerhatár sűrűségétől, a hkl indexektől, a rácsparaméterektől valamint az ikersík rendszertől függő konstansok. Síkhibák a reciprok térben csak és kizárólag a síkhibára merőleges irányban okoznak vonalszélesedést. Ezt a jelenséget a diffrakciós irodalomban, nevezetesen az elektron mikroszkópiában *streaking*-nek nevezzük. Az ikresedés ilyen természete miatt bevezetem az ikresedéshez igazodó koordináta rendszert, amelyben két rácsvektor, \mathbf{a}_x és \mathbf{a}_y , az ikersíkban fekszik a harmadik, \mathbf{a}_z , pedig a szomszéd sík legközelebbi rácspontjába mutat, amellett, hogy az így keletkező elemi cella térfogata megegyezik az adott kristály Bravais rácsának térfogatával. Ez utóbbi 111 síkokon ikresedő fcc kristályban hexagonális, míg piramidális síkokon ikresedő hcp kristályban triklin cella. Ezekben a hexagonális illetve triklin rendszerekben az x változó a hozzájuk konjugált reciprok terek \mathbf{b}_1 reciprok vektorai irányába mutat és L' -vel jelölöm [Balogh et. al., 2009(S)].

3. Elméleti megfontolások alapján megmutattam, hogy a B konstans értéke csak és kizárólag az ikerhatár sűrűség függvénye, amennyiben az x változót olyan b_i reciprok rácsvektor irányában választjuk, amely az adott ikersíkban fekvő két rácsvektor, a_x és a_y , elemi cella térfogattal normált vektoriális szorzata. A B konstans értékére a következő összefüggést állapítottam meg:

$$B(\beta) = \frac{2\beta}{D_{tri}\sqrt{1-\beta}}, \text{ ahol } D_{tri} = 5.775, \text{ miközben } 0 < \beta < 1 .$$

A jelen tézispont megállapítása tehát azt jelenti, hogy a streak-ek kiszélesedése csak és kizárólag az ikerhatárok sűrűségétől függ. A fenti összefüggésben a tri index arra utal, hogy az összefüggés csak a b_i irányban érvényes. Fontos megjegyezni továbbá, hogy D_{tri} numerikus értékét a DIFFaX szoftver alkalmazása révén kaptam [Balogh et. al., 2009(S)].

4. Meghatároztam az L' és g változók közötti kapcsolatot leíró $g(L')$ függvényt, ahol ezen két változó rendre a síkhibához igazodó a_x , a_y , a_z koordináta rendszer reciprok terében a b_i irányába, illetve a diffrakciós vektor irányába mutató változók. A g változó értéke $g=2\sin\theta/\lambda$. Megmutattam továbbá, hogy a $g(L')$ függvény, még a legkedvezőtlenebb esetekben is, igen jó közelítéssel lineáris az egyes streak-ek környezetében. A $g(L')$ függvény ezen viselkedése a garancia arra, hogy a 2. pontban megadott profil függvény alakja a g változó függvényében is megmarad [Balogh et. al., 2009(S)].

5. Megmutattam, hogy míg L' függvényében az ikresedés okozta vonalszélesedés teljes mértékben hkl független (eltekintve azoktól a speciális esetektől, amikor az ikresedés hatástalan a vonal alakra), a $g(L')$ függvény transzformációt alkalmazva, a g -ben felírt alreflexiók igen változatos és jellemző hkl és rácsparaméter függést mutatnak. Egy-egy streak g változó szerinti intenzitás eloszlását nevezem alreflexiónak. A teljes pordiffrakciós reflexiók az alreflexiók súlyozott összegeként állíthatók elő, ahol a súlyok az adott hkl indexeknek megfelelő normált multiplicitások. Az alreflexiók hkl és rácsparaméter függése öröklődik a pordiffrakciós reflexiókban. Ez a jelenség teszi lehetővé, hogy a síkhibák hatását el lehet választani a méret illetve diszlokációk okozta vonalszélesedéstől [Balogh et. al., 2006(S); Balogh et. al., 2009(S)].

6. Megmutattam, hogy rétegződési hibák okozta vonalszélesedés, $FWHM$, és vonal-eltolódás, Φ , a következő teljesen általános két egyenlettel adható meg:

$$FWHM = \ln[1 - 2\alpha(1 - \alpha)(1 - \cos(qs))] ,$$

$$\Phi = \text{atan} \frac{\alpha \sin(qs)}{1 - \alpha + \alpha \cos(qs)} ,$$

ahol s a rétegződési hiba által létrehozott eltolódás, q a szóban forgó reciprok-rácpont reciprok-rácsvektora és α a síkhiba sűrűsége. Az alreflexió egy szimmetrikus Lorentz típusú függvény [Balogh et. al., 2009(S)].

7. Numerikus módszert dolgoztam ki a síkhibák okozta vonalszélesedésnek az u.n. convolutional multiple whole profile (CMWP) eljárásba történő beillesztésére [Balogh et. al., 2006(S)]. Az így kiegészített eljárás az u.n. extended-CMWP vagy eCMWP módszer. Az alreflexiók szélességét illetve eltolódását a hibasűrűségek függvényében ötödfokú polinomokkal adom meg. Az eCMWP eljárás ezen polinomok együtthatói alapján határozza meg a megfelelő hibasűrűségeket. A polinomok alkalmazása a numerikus eljárás általános alkalmazhatósága szempontjából előnyösebb a konkrét, hibafüggő függvények felhasználása helyett [Balogh et. al., 2006(S); Balogh et. al., 2009(S)].

8. Az elméletre alapozott eCMWP eljárás hatékonyságát a következő rendszerek hibaszerkezetének a meghatározására alkalmaztam.

- 8.1. Nanokristályos illetve szubmikron szemcseméretű Cu-ban megállapítottam, hogy mintegy 40 nm-nél kisebb szemcseméret esetén jelentős ikresedés lép fel a diszlokációk jelenléte mellett [Balogh et. al., 2006(S)].
- 8.2. Szubmikron szemcseméretű Cu-Zn ötvözetekben megállapítottam, hogy a Zn tartalom növekedésével a deformáció hatására jelentősen megnő az ikerhatárok sűrűsége [Balogh et. al., 2008a(S); Ungár et. al., 2008a(S)].
- 8.3. Szintereléssel kompaktált nanokristályos SiC-ban és SiC-gyémánt nanokompozitban megmutattam, hogy a hőmérséklet és nyomás növekedésével, elsősorban a SiC-ban illetve SiC fázisban az ikerhibák sűrűsége jelentős mértékben lecsökken. A gyémánt komponensben az ikerhibák sűrűsége általában jelentős mértékben kisebb, mint a SiC fázisban [Gubicza et. al., 2007(S); Balogh et. al., 2008(S)].

- 8.4. Ipari tisztaságú titánban (CP-Ti) megmutattam, hogy a diszlokációk mellett az {10.2} dilatációs és {11.2} kompressziós íkrek képződnek a megfelelő piramidális síkokon [Ungár et. al., 2008(S); Balogh et. al., 2009(S)].
- 8.5. Összenomással deformált nagy tisztaságú Ti-ban megmutattam, hogy a diszlokációk mellett az {10.1}, {11.2} kompressziós íkrek képződnek a megfelelő piramidális síkokon [Balogh et. al., 2009(S)].
- 8.6. Különböző hőmérsékleteken nyújtással deformált nagy tisztaságú Mg-ban megmutattam, hogy a diszlokációk mellett az {11.1} dilatációs íkrek képződnek a megfelelő piramidális síkokon [Balogh et. al., 2009(S)].

Köszönetnyilvánítás

Mindenekelőtt *Dr. Ungár Tamás* témavezetőmnek tartozom köszönettel, a doktori munkám során nyújtott folyamatos szakmai és emberi támogatásáért, segítőkészségéért, türelméért és a magas szintű kutatási lehetőségek megteremtéséért.

Köszönettel tartozom az Anyagfizikai Tanszék tanszékvezetőjének, *Dr. Lendvai Jánosnak*, a támogatásáért és a kutatási feltételek biztosításáért.

Köszönöm *Dr. Tichy Gézának* a doktori munkám folyamán nyújtott segítségét és a hasznos beszélgetéseket.

Köszönöm továbbá *Dr. Zsoldos Lehelnek* a doktori munkám kísérleti részében nyújtott segítségét és támogatását.

Köszönettel tartozom *Dr. T. Waldek Zerda-nak* a SiC-gyémánt nanokompozitok témakörben történő sikeres együttműködésért.

Köszönettel tartozom *Dr. Ribárik Gábornak* és *Dr. Gubicza Jenőnek* a segítőkészségükért és a közös kutatási témáinkban a sikeres együttműködésért.

Köszönöm *Ö. Kovács Alajosnak* a minták méréshez való előkészítésében nyújtott segítségét.

Köszönettel tartozom a családomnak, a szüleimnek, akik kitartóan és fáradhatatlanul támogattak és mögöttem álltak a tanulmányaim során.

Irodalomjegyzék

A disszertációban felhasznált saját hivatkozások:

Balogh, L., Gubicza, J., Hellmig, R. J., Estrin, Y. & Ungár, T. Z. (2006a). *Kristallography Suppl.*, **23**, 381-386.

Balogh, L., Nauyoks, S., Zerda, T.W., Pantea, C., Stelmakh, S., Palosz, B., Ungár, T. (2008). *Mat. Sci. Eng. A* **487** 180-188.

Balogh, L., Ribárik, G. & Ungár, T., J. (2006). *Appl. Phys.*, **100**, 023512

Balogh, L., Tichy, G. & Ungár, T., *J. Appl. Cryst.*, **42**, (2009) in print

Balogh, L., Ungár, T., Zhao, Y., Zhu, Y.T., Horita, Z., Xu, C. & Langdon, T. G. (2008a). *Acta Mat.* **56**, 809-820.

Gubicza, J., Balogh, L., Hellmig, R.J., Estrin, Y. & Ungár, T. (2005). *Mater. Sci. Eng. A*, **400-401**, 334-338.

Gubicza, J., Nam, N.H., Balogh, L., Hellmig, R.J., Stolyarov, V.V., Estrin, Y., & Ungár, T. (2004). *J. Alloys and Compound*, **378**, 248.

Gubicza, J., Nauyoks, S., Balogh, L., Labar, L., Zerda, T. W. & Ungár, T., (2007). *J. Mater. Res.*, **22**, 5.

Ungár, T., Balogh, L., Ribárik, G. (2009). *J. Materials Science*, in press.

Ungár, T., Balogh, L., Ribárik, G., (2008a). *Materials Science Forum*, **584-586**, 571-578.

Ungár, T., Balogh, L., Zhu, Y. T., Horita, Z., Xu C. & Langdon, T. G. (2006). *Mat. Sci. Eng. A*, **444**, 153-156.

Ungár, T., Balogh, L., Zhu, Y. T., Ribárik, G., Xu, C., Horita, Z. & Langdon, T. G. (2006). Density of stacking faults and twin boundaries in ultrafine-grained materials determined by X-ray line profile analysis, *Ultrafine Grained Materials IV*. Edited by Y.T. Zhu, T.G. Langdon, Z. Horita, M.J. Zehetbauer, S.L. Semiatin, and T.C. Lowe. TMS (The Minerals, Metals & Materials Society).

Ungár, T., Glavicic, M.G., Balogh, L., Nyilas, K., Salem, A.A., Ribárik, G., Semiatin, S.L. (2008). *Mat. Sci. Eng. A* **493**, 79-85.

Az értekezéshez nem kapcsolódó saját publikációk:

Gémes, G., Balogh, L., Ungár, T. (2009). *Kovove Mater.*, in press.

Liu, M. P., Roven, H. J., Ungár, T., Balogh, L., Murashkin, M. & Valiev, R. Z. (2008). *Materials Science Forum*, **584-586**, 528-534.

Nauyoks, S., Wieligor, M., Zerda, T.W., Balogh, L., Ungár, T., Stephens, P. (2009). *Composites: Part A*, **40**, 566-572.

Roven, H. J., Liu, M., Murashkin, M., Valiev, R. Z., Kilmametov, A. R., Ungár, T. Balogh, L. (2009). *Materials Science Forum*, **604-605**, 179-185.

Woo, W., Balogh, L., Ungár, T., Choo, H. & Feng, Z. (2008). *Mat. Sci. Eng. A*, **498**, 308-313.

Síkhibák karakterizációja röntgen vonalprofil analízis alapján köbös és hexagonális kristályokban

A doktori értekezés tézisei

Balogh Levente

Témavezető:

Dr. Ungár Tamás

egyetemi tanár

ELTE TTK Fizika Doktori Iskola

Iskolavezető: Dr. Horváth Zalán

Anyagtudomány és Szilárdtestfizika Program

Programvezető: Dr. Lendvai János



Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar

Fizikai Intézet, Anyagfizikai Tanszék

Budapest 2009

A munka előzményei és célkitűzései

Kristályos anyagok számos fizikai tulajdonságát alapvetően meghatározza a mikroszerkezet, aminek igen sokféle megjelenési formája létezik és így azonos kristályszerkezetű anyagokat nagyon különböző fizikai tulajdonsággal tud felruházni. Egy kristályos anyag keménysége, ridegsége, folyáshatára és sok más tulajdonsága erősen mikroszerkezet függő. A fémek és ötvözeiknek az alakítási-, szilárdoldatos-, kiválósos keményítése mind a mikroszerkezet megfelelő módon történő módosításával történik.

Egy anyag mikroszerkezetét az előállítási körülmények illetve az utólagosan alkalmazott kezelések határozzák meg. Ahhoz, hogy változatos és tervezhető fizikai tulajdonságokkal rendelkező anyagokat állíthassunk elő, szükség van olyan módszerekre, amik segítségével meghatározhatjuk az anyagban előforduló kristályhibák mennyiségét és minőségét, vagyis a mikroszerkezetet.

A röntgen vonalprofil analízis (RVPA) az utóbbi időben a transzmissziós elektron mikroszkópia (TEM) mellett a mikroszerkezet vizsgálatának egyik leghatékonyabb alternatív módszerévé fejlődött. A RVPA számos vonatkozásban hasonló, ugyanakkor igen sok tekintetben más típusú információkat szolgáltat a mikroszerkezetről mint a TEM.

A RVPA módszere alapvetően két különböző mikroszerkezeti elemről ad felvilágosítást: (i) a kristallit méretről, illetve (ii) a különböző kristályhibák sűrűségéről és eloszlásáról. A kristallit méret valamint a diszlokációk és ponthibák hatásának fizikai modelljeit az utóbbi években sikerült kidolgozni.

Az különböző rétegeződési hibák, ugyanolyan vagy még erőteljesebb hatást gyakorolnak a vonalszélesedésre, mint a diszlokációk. Kőbös fémek vagy ötvözetek esetében a rétegeződési hibák akkor játszanak fontos szerepet, amikor a rétegeződési hiba energia kicsiny. Ilyen néhány tiszta fém, például az ezüst és nikkel vagy néhány ötvözet, mint a sárgaréz, rozsdamentes acél vagy a Ni3Al fémközi vegyület. Hexagonális szerkezetű fémekben, mint például Ti, Zr és Mg-ban eleve nincs meg a képlékeny alakváltozás kompatibilitásához szükséges legalább öt csúszási rendszer, ezért ezekben a tiszta fémekben az ikerképződés a képlékeny deformáció egyik alapvető módusa.

A jelen disszertációban a síkhibák, nevezetesen az ikerhatárok és rétegeződési hibák kvalitatív és kvantitatív meghatározásának a módszerét dolgozom ki a röntgen vonalprofil analízis alapján lapcentrált kőbös (fcc) és szoros illeszkedésű hexagonális (hcp) kristályok esetében.

Új tudományos eredmények

1. Általános elméletet dolgoztam ki ikerhatárok által okozott diffrakciós vonalkiszéledésre. Megmutattam, hogy ez az elmélet egyaránt alkalmazható u.n. *részlegesen-merohedrális* illetve *nem-merohedrális* ikresedés esetén. Lényeges megjegyezni, hogy a különböző *merohedralitás* kristallográfiai szempontból alapvetően eltérő viselkedést eredményez [Balogh et. al., 2009(S)].
2. Kidolgoztam az ikresedés kettős-lamella modelljét, amelynek alapján megmutattam, hogy az ikresedés okozta vonalszéledés általános profil függvénye mindig egy szimmetrikus és antiszimmetrikus Lorentz típusú függvény összege, ami a következő alakban írható:

$$\frac{1+A(x-x_0)}{1-[(x-x_0)/B]^2} ,$$

ahol x_0 az adott reflexió helyzete, továbbá A és B az ikerhatár sűrűségétől, a hkl indexektől, a rácsparaméterektől valamint az ikersík rendszertől függő konstansok. Síkhibák a reciprok térben csak és kizárólag a síkhibára merőleges irányban okoznak vonalszéledést. Ezt a jelenséget a diffrakciós irodalomban, nevezetesen az elektron mikroszkópiában *streaking*-nek nevezzük. Az ikresedés ilyen természete miatt bevezetem az ikresedéshez igazodó koordináta rendszert, amelyben két rácsvektor, \mathbf{a}_x és \mathbf{a}_y , az ikersíkban fekszik a harmadik, \mathbf{a}_z , pedig a szomszéd sík legközelebbi rácspontjába mutat, amellett, hogy az így keletkező elemi cella térfogata megegyezik az adott kristály Bravais rácsának térfogatával. Ez utóbbi 111 síkokon ikresedő *fcc* kristályban hexagonális, míg piramidális síkokon ikresedő *hcp* kristályban triklin cella. Ezekben a hexagonális illetve triklin rendszerekben az x változó a hozzájuk konjugált reciprok terek \mathbf{b}_l reciprok vektorai irányába mutat és L' -vel jelölöm [Balogh et. al., 2009(S)].

3. Elméleti megfontolások alapján megmutattam, hogy a B konstans értéke csak és kizárólag az ikerhatár sűrűség függvénye, amennyiben az x változót olyan \mathbf{b}_l reciprok rácsvektor irányában választjuk, amely az adott ikersíkban fekvő két rácsvektor, \mathbf{a}_x és \mathbf{a}_y , elemi cella térfogattal normált vektoriális szorzata. A B konstans értékére a következő összefüggést állapítottam meg:

$$B(\beta) = \frac{2\beta}{D_{tri}\sqrt{1-\beta}}, \quad \text{ahol } D_{tri} = 5.775, \text{ miközben } 0 < \beta < 1.$$

A jelen tézispont megállapítása tehát azt jelenti, hogy a streak-ek kiszélesedése csak és kizárólag az ikerhatárok sűrűségétől függ. A fenti összefüggésben a tri index arra utal, hogy az összefüggés csak a b_I irányban érvényes. Fontos megjegyezni továbbá, hogy D_{tri} numerikus értékét a DIFFaX szoftver alkalmazása révén kaptam [Balogh et. al., 2009(S)].

4. Meghatároztam az L' és g változók közötti kapcsolatot leíró $g(L')$ függvényt, ahol ezen két változó rendre a síkhibához igazodó a_x, a_y, a_z koordináta rendszer reciprok terében a b_I irányába, illetve a diffrakciós vektor irányába mutató változók. A g változó értéke $g=2\sin\theta/\lambda$. Megmutattam továbbá, hogy a $g(L')$ függvény, még a legkedvezőtlenebb esetekben is, igen jó közelítéssel lineáris az egyes streak-ek környezetében. A $g(L')$ függvény ezen viselkedése a garancia arra, hogy a 2. pontban megadott profil függvény alakja a g változó függvényében is megmarad [Balogh et. al., 2009(S)].
5. Megmutattam, hogy míg L' függvényében az ikresedés okozta vonalszélesedés teljes mértékben hkl független (eltekintve azoktól a speciális esetektől, amikor az ikresedés hatástalan a vonal alakra), a $g(L')$ függvény transzformációt alkalmazva, a g -ben felírt alreflexiók igen változatos és jellemző hkl és rácsparaméter függést mutatnak. Egy-egy streak g változó szerinti intenzitás eloszlását nevezem alreflexiónak. A teljes pordiffrakciós reflexiók az alreflexiók súlyozott összegeként állíthatók elő, ahol a súlyok az adott hkl indexeknek megfelelő normált multiplicitások. Az alreflexiók hkl és rácsparaméter függése öröklődik a pordiffrakciós reflexiókban. Ez a jelenség teszi lehetővé, hogy a síkhibák hatását el lehet választani a méret illetve diszlokációk okozta vonalszélesedéstől [Balogh et. al., 2006(S); Balogh et. al., 2009(S)].
6. Megmutattam, hogy rétegződési hibák okozta vonalszélesedés, $FWHM$, és vonal-eltolódás, Φ , a következő teljesen általános két egyenlettel adható meg:

$$FWHM = \ln[1 - 2\alpha(1 - \alpha)(1 - \cos(qs))] ,$$

$$\Phi = \arctan \frac{\alpha \sin(qs)}{1 - \alpha + \alpha \cos(qs)} ,$$

ahol s a rétegződési hiba által létrehozott eltolódás, q a szóban forgó reciprok-rácspont reciprok-rácsvektora és α a síkhiba sűrűsége. Az alreflexió egy szimmetrikus Lorentz típusú függvény [Balogh et. al., 2009(S)].

7. Numerikus módszert dolgoztam ki a síkhibák okozta vonalszélesedésnek az u.n. convolutional multiple whole profile (CMWP) eljárásba történő beillesztésére [Balogh et. al., 2006(S)]. Az így kiegészített eljárás az u.n. extended-CMWP vagy eCMWP módszer. Az alreflexiók szélességét illetve eltolódását a hibasűrűségek függvényében ötödfokú polinomokkal adom meg. Az eCMWP eljárás ezen polinomok együtthatói alapján határozza meg a megfelelő hibasűrűségeket. A polinomok alkalmazása a numerikus eljárás általános alkalmazhatósága szempontjából előnyösebb a konkrét, hibafüggő függvények felhasználása helyett [Balogh et. al., 2006(S); Balogh et. al., 2009(S)].
8. Az elméletre alapozott eCMWP eljárás hatékonyságát a következő rendszerek hibaszervezetének a meghatározására alkalmaztam.
 - 8.1. Nanokristályos illetve szubmikron szemcseméretű Cu-ban megállapítottam, hogy mintegy 40 nm-nél kisebb szemcseméret esetén jelentős ikresedés lép fel a diszlokációk jelenléte mellett [Balogh et. al., 2006(S)].
 - 8.2. Szubmikron szemcseméretű Cu-Zn ötvözetekben megállapítottam, hogy a Zn tartalom növekedésével a deformáció hatására jelentősen megnő az ikerhatárok sűrűsége [Balogh et. al., 2008a(S); Ungár et. al., 2008a(S)].
 - 8.3. Szintereléssel kompaktált nanokristályos SiC-ban és SiC-gyémánt nanokompozitban megmutattam, hogy a hőmérséklet és nyomás növekedésével, elsősorban a SiC-ban illetve SiC fázisban az ikerhibák sűrűsége jelentős mértékben lecsökken. A gyémánt komponensben az ikerhibák sűrűsége általában jelentős mértékben kisebb, mint a SiC fázisban [Gubicza et. al., 2007(S); Balogh et. al., 2008(S)].
 - 8.4. Ipari tisztaságú titánban (CP-Ti) megmutattam, hogy a diszlokációk mellett az $\{10.2\}$ dilatációs és $\{11.2\}$ kompressziós ikrek képződnek a megfelelő piramidális síkokon [Ungár et. al., 2008(S); Balogh et. al., 2009(S)].
 - 8.5. Összenomással deformált nagy tisztaságú Ti-ban megmutattam, hogy a diszlokációk mellett az $\{10.1\}$, $\{11.2\}$ kompressziós ikrek képződnek a megfelelő piramidális síkokon [Balogh et. al., 2009(S)].

8.6. Különböző hőmérsékleteken nyújtással deformált nagy tisztaságú Mg-ban megmutattam, hogy a diszlokációk mellett az {11.1} dilatációs ikrek képződnek a megfelelő piramidális síkokon [Balogh et. al., 2009(S)].

Köszönetnyilvánítás

Mindenekelőtt *Dr. Ungár Tamás* témavezetőmnek tartozom köszönettel, a doktori munkám során nyújtott folyamatos szakmai és emberi támogatásáért, segítőkészségéért, türelméért és a magas szintű kutatási lehetőségek megteremtéséért.

Köszönettel tartozom az Anyagfizikai Tanszék tanszékvezetőjének, *Dr. Lendvai Jánosnak*, a támogatásáért és a kutatási feltételek biztosításáért.

Köszönöm *Dr. Tichy Gézának* a doktori munkám folyamán nyújtott segítségét és a hasznos beszélgetéseket.

Köszönöm továbbá *Dr. Zsoldos Lehelnek* a doktori munkám kísérleti részében nyújtott segítségét és támogatását.

Köszönettel tartozom *Dr. T. Waldek Zerda-nak* a SiC-gyémánt nanokompozitok témakörben történő sikeres együttműködésért.

Köszönettel tartozom *Dr. Ribárik Gábornak* és *Dr. Gubicza Jenőnek* a segítőkészségükért és a közös kutatási témáinkban a sikeres együttműködésért.

Köszönöm *Ö. Kovács Alajosnak* a minták méréshez való előkészítésében nyújtott segítségét.

Köszönettel tartozom a családomnak, a szüleimnek, akik kitartóan és fáradhatatlanul támogattak és mögöttem álltak a tanulmányaim során.

Irodalomjegyzék

A disszertációban felhasznált saját hivatkozások:

Balogh, L., Gubicza, J., Hellmig, R. J., Estrin, Y. & Ungár, T. Z. (2006a). *Kristallography Suppl.*, **23**, 381-386.

Balogh, L., Nauyoks, S., Zerda, T.W., Pantea, C., Stelmakh, S., Palosz, B., Ungár, T. (2008). *Mat. Sci. Eng. A* **487** 180-188.

Balogh, L., Ribárik, G. & Ungár, T., J. (2006). *Appl. Phys.*, **100**, 023512

Balogh, L., Tichy, G. & Ungár, T., *J. Appl. Cryst.*, **42**, (2009) in print

Balogh, L., Ungár, T., Zhao, Y., Zhu, Y.T., Horita, Z., Xu, C. & Langdon, T. G. (2008a). *Acta Mat.* **56**, 809-820.

Gubicza, J., Balogh, L., Hellmig, R.J., Estrin, Y. & Ungár, T. (2005). *Mater. Sci. Eng. A*, **400-401**, 334-338.

Gubicza, J., Nam, N.H., Balogh, L., Hellmig, R.J., Stolyarov, V.V., Estrin, Y., & Ungár, T. (2004). *J. Alloys and Compound*, **378**, 248.

Gubicza, J., Nauyoks, S., Balogh, L., Labar, L., Zerda, T. W. & Ungár, T., (2007). *J. Mater. Res.*, **22**, 5.

Ungár, T., Balogh, L., Ribárik, G. (2009). *J. Materials Science*, in press.

Ungár, T., Balogh, L., Ribárik, G., (2008a). *Materials Science Forum*, **584-586**, 571-578.

Ungár, T., Balogh, L., Zhu, Y. T., Horita, Z., Xu C. & Langdon, T. G. (2006). *Mat. Sci. Eng. A*, **444**, 153-156.

Ungár, T., Balogh, L., Zhu, Y. T., Ribárik, G., Xu, C., Horita, Z. & Langdon, T. G. (2006). Density of stacking faults and twin boundaries in ultrafine-grained materials determined by X-ray line profile analysis, *Ultrafine Grained Materials IV*. Edited by Y.T. Zhu, T.G. Langdon, Z. Horita, M.J. Zehetbauer, S.L. Semiatin, and T.C. Lowe. TMS (The Minerals, Metals & Materials Society).

Ungár, T., Glavicic, M.G., Balogh, L., Nyilas, K., Salem, A.A., Ribárik, G., Semiatin, S.L. (2008). *Mat. Sci. Eng. A* **493**, 79-85.

Az értekezéshez nem kapcsolódó saját publikációk:

Gémes, G., Balogh, L., Ungár, T. (2009). *Kovove Mater.*, in press.

Liu, M. P., Roven, H. J., Ungár, T., Balogh, L., Murashkin, M. & Valiev, R. Z. (2008). *Materials Science Forum*, **584-586**, 528-534.

Nauyoks, S., Wieligor, M., Zerda, T.W., Balogh, L., Ungár, T., Stephens, P. (2009). *Composites: Part A*, **40**, 566-572.

Roven, H. J., Liu, M., Murashkin, M., Valiev, R. Z., Kilmametov, A. R., Ungár, T. Balogh, L. (2009). *Materials Science Forum*, **604-605**, 179-185.

Woo, W., Balogh, L., Ungár, T., Choo, H. & Feng, Z. (2008). *Mat. Sci. Eng. A*, **498**, 308-313.